Kâzım Karabekir Eğitim Fakültesi Dergisi Yıl: 2005 Sayı: 11

DÜZENSİZLİK ve MİKRO HALLER: ENTROPİ

Ahmet GÜRSES*
Mustafa SÖZBİLİR**
Metin AÇIKYILDIZ***

ÖZET

Bu çalışmada yüksek öğretim kurumlarında Termodinamik içerikli olarak okutulmakta olan Kimya derslerinde öğretimi güç bir kavram olarak dikkat çeken entropi kavramıyla ilgili düzenlemelere ve açıklamalara yer verilmiştir. Entropi kavramı günümüze kadar sistemlerin düzensizliğinin bir ölçüsü olarak öğretilmiş ve bu yaklaşım da öğrenci anlayışlarının, çevresindeki olayların, bir kaosun parçasıymış gibi gelişmesine neden olmuştur. Doğal yaşamla ilgili izlenimleri mükemmel bir düzen unsuru taşımasına rağmen öğrendiklerinin bu durumla çelişiyor gözükmesi entropinin tanımdan öteye öğrenci hayatına yansımamasına neden olmaktadır. Bu çalışmayla entropiye ilişkin çeşitli ipuçları sunarak, entropiyi öğretmenlerin bile anlatmaktan çekindikleri bir konu olmaktan çıkarmak amaçlanmaktadır.

Anahtar Kelimeler: *Entropi, mikro hal, düzensizlik, termodinamik ihtimaliyet*

DISORDER and MICROSTATES: ENTROPY

---

* Prof.Dr.,Atatürk Üniversitesi, Kazım Karabekir Eğitim Fakültesi, Kimya Bölümü, Erzurum. e-mail: ahmetgu@yahoo.com / fax:+90 442 236 09 55

** Yrd.Doç.Dr., Atatürk Üniversitesi. Kazım Karabekir Eğitim Fakültesi. Kimya Bölümü, Erzurum.

*** Arş.Gör., Atatürk Üniversitesi, Kazım Karabekir Eğitim Fakültesi. Kimya Bölümü. Erzurum.

ABSTRACT

In this study, it was discussed preparations and explanations related to entropy attract attention as a difficult concept in the chemistry courses contents thermodynamics in the higher education. Entropy concept has been taught as level of disorder of systems until now, but this approach cause the development of the students' views and their environment events as a part of the chaos. Despite of the fact that this situation contradiction with their impressions as a perfect order factor related to natural life, the entropy beyond the description do not further and it has caused to perform any experience. As a result, some hints are given to students about entropy and the entropy is aimed to eradicate as fearful subject even if the teacher has lack of understanding.

Key words: *Entropy, microstates, disorder, thermodynamic probability.*

Entropi Kavramı ve Düzensizlik

Clausius, hiç hayal etmediği bir biçimde de olsa, artık on sekiz yıllık çalışmasının sonuna gelmişti. 1850 yılında sadece yeni bir ısı teorisi oluşturmak amacıyla yola çıkmıştı. Gerçi bunu başarmıştı başarmasına ama aynı zamanda, doğanın yasalarında insan yaşamıyla ilgili tatsız bir gerçeği ortaya koyan bir eşitsizliğe de ulaşmıştı: Hayatı destekleyen fedakâr bir Evren'de değil, hayatın yok olması pahasına varlığını sürdüren vurguncu bir Evren'de yaşıyorduk (Guillen, 1995). Dünyayı değiştiren denklemler arasında gösterilen, ΔS_{evren}>O eşitsizliğine hayatın ölüm taşıyan yüzünü görerek ulaşan Alman Fizikçi Rudolf Julius Clausius, Britannica ansiklopedisinde sistemin enerjisinin işe dönüştürülemeyen kısmının ölçüsü, iş düzenden elde edildiğinden sistemin düzensizliğinin, rasgeleliğinin ölçüsü şeklinde tanımlanan, entropi kavramına ısı makineleriyle ilgili çalışmalara ışık tutmaya çalışırken 1854 yılında ulaşmıştır. Başlangıçta bu hal fonksiyonunu "S" "transformation content (içerik dönüşümü)" olarak

isimlendirmiş daha sonra Yunanca dönüşüm anlamına gelen "trope" kelimesinden yola çıkarak entropi olarak yeniden adlandırmıştır. Bu yeni adlandırmada, entropinin ısının işe dönüştürülmesiyle ilgili olması etkin olmuştur (Levine, 1988)

Bazı genel kimya kitapları entropiyi; düzensizlik (Zumdahl, 1992; McMurry and Fay, 1995; Ebbing, 1996; Umland and Bellama, 1996; Masterton and Hurley, 1997), rasgelelik (Zumdahl, 1992; Brady and Holum, 1993; McMurry and Fay, 1995; Ebbing, 1996), dağılma (Moore et al, 1998) ya da mikrohallerin sayısı (Oxtoby et al, 1998) olarak açıklar. Bu açıklamalara ilave olarak entropi, termokimya için evrendeki madde ve enerjinin doğal eğilimini açıklamaya yardım eden temel bir kavram olarak da görülmektedir (Tomanek, 1994).

Bu kavramın temel teşkil ettiği termodinamiğin ikinci kanunu hangi tür proseslerin kendiliğinden gerçekleşeceğini belirlemeye çalışır (Lechner, 1999). İkinci kanun entropiye dayalı olarak, kendiliğinden yürüyen bir değişim sırasında izole bir sistemin entropisi artar şeklinde açıklanır (Atkins, 1998). Bu konudaki önemli yanılgılar, sistemin şartlarının göz ardı edilmesiyle ve genel olarak toplam entropinin (çevre ve sistemin toplam entropisi) yerine sistemin entropisinin dikkate alınmasıyla ortaya çıkar.

Fizik ve Kimya kitaplarında enerji ile ilgili çok ayrıntılı anlatımlar bulunmasına karşın Entropi kavramından şöyle üstünkörü söz edilir ve geçilir. Öğrenciler bu konuyu tam kavramadan dönem biter, entropi de unutulur gider. Oysa birçok fiziksel ve kimyasal sürecin anlaşılmasında entropi kavramının önemi çok büyüktür. Tüm doğal süreçlerde bir enerji dönüşümü söz konusudur. Doğal süreçlerdeki yön, enerjinin dönüşüm yönü tarafından belirlenir. Kapalı sistemlerde enerji hiçbir zaman tümüyle diğer bir enerji formuna (örneğin mekanik enerjiye) dönüşmez. Enerji, sıcaklığı yüksek olan cisimlerden düşük olanlara doğru ısı şeklinde aktarılırken, bu

süreç dönüşümsüzdür. İçten yanmalı bir motorda yanma olayı sırasında açığa çıkan enerjinin mekanik enerjiye dönüşümü esnasında bu enerjinin bir kısmı iş üretme yeteneği gösterememektedir. Mühendislerin bakış açısıyla, yukarıdaki açıklamalar dikkate alındığında iş üretme yeteneğinde olmayan enerjinin evrende geri kazanımı mümkün olmayan biçimde artışı entropi ile ölçülür denilebilir (Külahoğlu, 2004).

Entropinin mikro düzeyde tartışılmasından ziyade düzensizliğin bir ölçüsü olarak gösterilmesi ve sistemlerin maksimum düzensizlik eğiliminde olmaları genellemesinin öğrencilerde bu anlaşılması güç kavramla ilgili yanlış kavramalara neden olduğu çeşitli araştırmacılar tarafından tespit edilmiştir. Entropiyle ilgili olarak literatürde tespit edilen kavram yanılgıları şu şekilde sıralanabilir:

- Entropi sistemdeki düzensizliğin sebebidir (Sözbilir, 2001).
- Entropi sistemin düzensizliğine eşittir (Sözbilir, 2001).
- Entropi arttığı zaman sıcaklıkta artar (Sözbilir, 2001).
- İkinci kanuna göre kendiliğinden gerçekleşen olaylarda sistemin entropisi artmalıdır (Thomas ve Schwenz, 1998).
- Entropi sistem üzerine iş yapıldığını gösterir (Selepe ve Bradley, 1997).
- Mikro hal küçük bir haldir. Entropiyle ilişkili değildir (Sözbilir, 2001).
- Evrenin entropisi değişmez ya da azalır (Sözbilir, 2001).
- Bir sistem her zaman maksimum entropili hale gider (Sözbilir, 2001).
- Bir reaksiyonun entropi değişimi her zaman pozitiftir (Sözbilir, 2001).

Bilindiği üzere, herhangi bir konuyla ilgili kavram yanılgılarının farkında olunması, yürütülecek eğitim-öğretim faaliyetlerine yön vermesi açısından önemlidir (Canpolat, 2002 ve Pınarbaşı, 2002). Bu çalışmada ise entropi kavramıyla ilgili kavram yanılgılarının bir kısmının oluşumunu engelleyecek türden bakış açıları sunulmaya çalışılacaktır.

Entropi: Moleküler Yaklaşım ve İstatistiksel Termodinamik

Entropi kavramı, Louis de Broglie' nin yaklaşımları ve Boltzmann dağılımı dikkate alınarak mikro hallerin sayısı ve istatistiksel yorumlara dayalı olarak açıklanabilir. Boltzmann formülü;

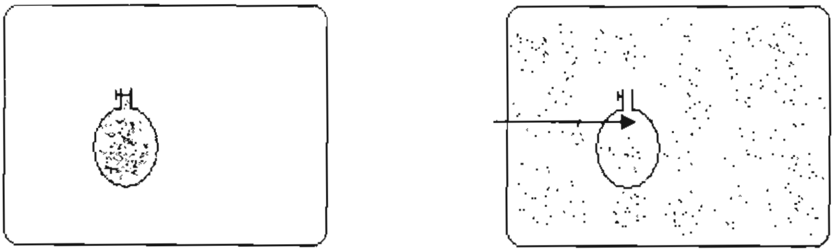
$S=k_b \ln W,$

$\Delta S=k_b \ln(W_2/W_1)$

(1)

termodinamik ihtimaliyetin entropiye katkısını ifade ederek entropinin matematiksel açıklamasını ortaya koyar ve en az Einstein'ın $E= mC^2$ eşitliği kadar önemlidir (Cho, 2002) . Denklemdeki W "termodinamik ihtimaliyeti" ifade eder. Termodinamik ihtimaliyet sıcaklık, basınç, hacim, her bir bileşenin mol sayısıyla belirlenmiş termodinamik bir hal olan özel bir makro hale karşılık gelen mikro hallerin sayıdır (Maes and Redig, 2000;).

Mikro hal ifadesiyle; özel bir sistemdeki her bir taneciğin (atom ya da molekül) konum ve momentumlarını belirterek açıklayan hal kastedilmektedir. Mikro hallere bağlı olarak makro durum ve olaylardan bahsedilebilir. Bu bahis aynı zamanda makro durumun gözlenebilmesini, destekleyen mikro hallerin sayısına bağlı olarak genişletilebilir. Bu nedenle bir olayı ya da durumu sağlayan mikro hallerin sayısı ne kadar fazla ise o durumun gerçekleşme ihtimali o kadar fazladır denilebilir (www.entropysite.com).



Şekil 1. Kapağı açık balondaki bir gazın kendiliğinden genleşmesi

İçi Bütan gazı ile dolu bir balonun kapağı açıldığında gazın bulunduğu odayı kaplayacak şekilde Şekil 1 de görüldüğü gibi difüze olması kendiliğinden gerçekleşiyor olmasına rağmen gazın balonda, dağılmadan kalması gözlenmemiştir. Bu durum gazın dağılması olayını destekleyen mikro hallerin sayısının dağılmamasını destekleyen mikro hallerin sayısından fazla oluşuyla açıklanabilir. İkinci kanunda yer alan kendiliğinden gerçekleşen olaylar entropi artışıyla yürür ifadesinden yola çıkılarak ve mikro hallerin sayısı ile entropi arasındaki ilişki dikkate alındığında bu örnekte hacim artışıyla mikro hallerin sayısında bir artış olduğu ve bu yüzdende entropinin arttığı söylenebilir. Ancak bu durum birçok Temel Kimya ders kitabında, hacmin artmasıyla taneciklerin düzensizliğinin arttığı ve bu nedenle de entropinin arttığı şeklinde açıklanmaktadır.

Örneğimizde sıcaklık artışını sağladığımızı farzedersek entropinin taneciklerin bulunabileceği enerji seviyesi sayısındaki artıştan dolayı artacağını söyleyebiliriz. Ancak bu durumla ilgili yine ders kitaplarındaki önemli yanılgı, sıcaklıkla taneciklerin düzensizliğindeki artışın entropi artışına neden olduğu şeklindedir.

Mikro hal kavramı ve ihtimaliyet ilişkisi bir satranç tahtası ve satranç taşları dikkate alınarak da açıklanabilir. Taneciklerin momentumları taşların

oyun içindeki değerleriyle (piyon ve vezirin farklı değerlerde olması gibi), konumları da satranç tahtası üzerindeki karelerle ilişkilendirilirse taş türünün yani momentum çeşitliliğinin ve kare sayısının yani konum seçeneğinin artması her bir duruma karşılık gelen mikro hallerin sayısının artmasıyla ilişkilendirilebilir.

Hacim ve sıcaklıktaki değişimin entropiye katkısının, mikro haller düzeyinde açıklanmasında kuantum fiziğinin temel örneklerinden olan "Kutudaki Tanecik" dikkate alınabilir (Lambert, 2002a; Atkins and Jones, 2002)

Kutudaki taneciğin enerjisi aşağıdaki eşitlik gereğince sınırlandırılmıştır.

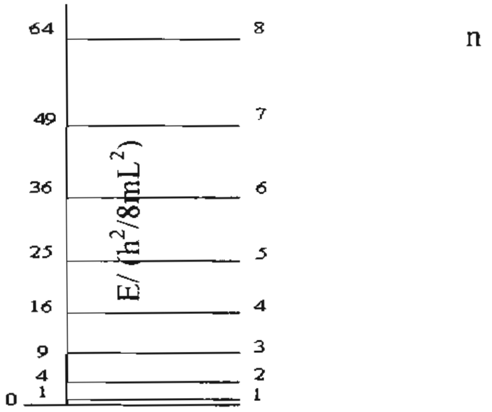
$$E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2} \qquad n=1,2,\ldots \qquad (2)$$

n: kuantum sayısı, h: Planck sabiti (6,62608x10^{-34} J.s), m: taneciğin kütlesi, L: kutunun boyu

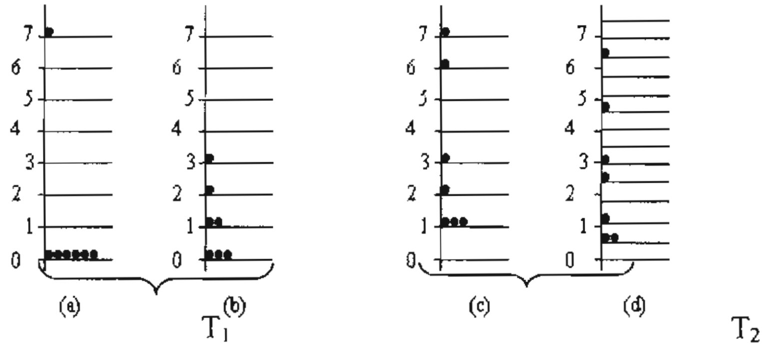
Kutudaki tanecik örneği için eşitlik 2 uyarınca taneciğin enerjisinin kuantlaştığı klasik yaklaşımın bir sonucu olarak söylenebilir. Enerji ve dalga fonksiyonları n 'kuantum sayısı' ile tanımlanmıştır. Kuantum sayısı bir etiketleme aracı olması yanında çoğunlukla sistemin içerisinde bulunduğu duruma karşılık gelen enerjinin hesaplanması ve dalga fonksiyonunun açık biçimde yazılması için de kullanılabilir (Atkins, 1998). Kutudaki tanecik için mümkün enerji seviyeleri Şekil 2'de gösterilmiştir.

Şekil 2 incelendiğinde m kütleli, x=0 ve x=L' de bulunan iki duvar arasına hapsedilmiş bir taneciğe eşlik eden enerji seviyelerinin n^2 ile orantılı olarak arttığı ve kuantum sayısı büyüdükçe seviyeler arasındaki aralığın genişlediği görülmektedir.

2 nolu denklem dikkate alındığında, kutunun hacmindeki artışın herhangi bir kuantum sayısına karşılık gelen enerji değerinin azalmasına yol açacağı görülebilir. Bu durum her hangi bir taneciğin bulunabileceği enerji seviyesi sayısının artmasına neden olur. Kutudaki taneciğe ait mikrohallerin sıcaklık ve hacimle ilişkisine ait örnek bir durum Şekil 3'de gösterilmiştir (http://www.cchem.berkeley.edu).



Şekil 2. Kutudaki tanecik için mümkün enerji seviyeleri



Şekil 3. Enerji dağılımı ve mikro hal sayısının sıcaklık ve hacimle ilişkisi

a) T_1 sıcaklığında ve V_1 hacminde 1. makro hal
b) T_1 sıcaklığında ve V_1 hacminde 2. makro hal
c) T_2 sıcaklığında ve V_1 hacminde 3. makro hal
d) T_2 sıcaklığında ve V_2 hacminde 4. makro hal

$T_1<T_2$ ve $V_1<V_2$

$$\text{Mikro hallerin sayısı} = \frac{N!}{n_0!\,n_1!....n_i!} \quad (3)$$

3 denkleminden yola çıkarak 1. makro hale karşılık gelen mikro hallerin sayısı şu şekilde hesaplanabilir:

$$\text{Mikro hallerin sayısı} = \frac{7!}{6!1!} = 7$$

Bu sonuç 1. makro hale karşılık gelen 7 farklı mikro hal olduğunu gösterir.

2. makro hali destekleyen mikro hallerin sayısı ise;

$\frac{7!}{3!2!1!1!} = 420$ şeklinde hesaplanır. Bu durum 2.makro halin gözlenme ihtimalinin 1.makro halin gerçekleşme ihtimalinden 60 kat fazla olduğunu gösterir.

3. makro halin sıcaklık artışıyla gerçekleştiği şekil 3'den görülmektedir. Sıcaklık artışıyla taneciklerin daha yüksek enerji seviyelerinde bulunma ihtimali de artar.

Bu makro hale karşılık gelen mikro hallerin sayısı;

$\frac{7!}{3!1!1!1!1!} = 840$ olarak hesaplanır.

4. makro halin 3.makro halden hacim artışıyla gerçekleştiği yine şekil 3'den görülmektedir. Hacim artışıyla enerji seviyeleri arasındaki farkın

azalmasından dolayı taneciklerin işgal edebileceği enerji seviyesi sayısı artar. Bu nedenle bu makro hali destekleyen mikro hallerin sayısı;

$\frac{7!}{2!1!1!1!1!\ 1!}$ =2520 şeklinde bulunur.

Bu sonuçlardan makro hallere karşılık gelen mikro hallerin sayısının 1<2<3<4 şeklinde sıralanabileceği görülür. Bu durum "S=klnW" eşitliği gereğince incelendiğinde;

S_a= 2,68.10^{-23} J/K S_c= 9,29.10^{-23} J/K

S_b= 8,34.10^{-23} J/K S_d= 1,08.10^{-22} J/K

$S_a<S_b<S_c<S_d$ olduğu görülür. Bu sonuçlar sıcaklık ve hacimdeki değişimlerle entropi arasındaki ilişki ile uyumludur.

Hal değişimleri sırasında (katı-sıvı-gaz halleri arasındaki değişimler) entropi değişimi düzensizlikteki değişimle açıklanmaya çalışılır. Bu anlamdaki düzensizlik ise moleküler serbesti ile ilişkilendirilir. Oysaki öteleme, dönme ve titreşim hareketleri dikkate alındığında bu hareketlerin mikro hallere olan katkısı aynı zamanda entropi değişimini de açıklar.

Sonuç

Entropiye mikro haller açısından yaklaşımların sunulduğu yukarıdaki tartışmaların sonucu olarak entropi konusunda enerji dağılımının önemi vurgulanmalıdır. Makro nesnelere ya da mikro nesnelere eşlik eden enerji, fiziksel bir engel ya da aktivasyon enerjisi gibi kimyasal bir engel yoksa, lokal durumdan ayrılır, yayılır ve dağılır. Enerjinin dağılımı, fiziksel ya da kimyasal olaylara yön verir ve bu değişimlerin yürütücü kuvvetidir. Enerjinin dağılımı rasgele olmamaktan ziyade olasılıklıdır. Sonuç olarak geniş bir sistemin içinde enerjinin yoğun olarak bulunduğu küçük bölümler geçici olarak var olabilir ancak bu duruma ait ihtimaliyet son derece

düşüktür. Tüm bu açıklamalar ışığında, entropi değişiminin, bir T sıcaklığında, enerjinin dağılım indeksi olduğu söylenebilir (Bindel, 2004; Lambert, 2002a; 2002b). Bu çalışmada vurgulanmak istenen en önemli nokta ise entropinin düzensizlik ya da rasgelelik ve/veya düzensizliğin ya da rasgeleliğin ölçüsü olmadığıdır (Lambert, 2002a).

Teşekkür: Kuantum teorisiyle ilgi bölümlerde yapmış olduğu katkılardan dolayı Atatürk Üniversitesi öğretim üyelerinden Doç. Dr. Önder ŞİMŞEK' e teşekkür ediyoruz.

KAYNAKLAR

Atkins, P. W. and Jones, L. Chemical Principles: The Quest for Insight,2nd ed.; W. H. Freeman: New York, 2002; pp 354–357.

Atkins, P. W., Physical Chemistry, 6th ed.; Oxford University Press, Oxford Melburn Tokyo, 1998

Bindel, T. H., 2004. Teaching Entropy Analysis in the First-Year High School Course and Beyond, Journal of Chemical Education. 81(11) 1585-1594.

Brady, J. E. and Holum, J. R. Chemistry: The Study of Matter and Its Changes; Wiley: New York, 1993

Canpolat, N., 2002. Kimyasal Denge ile İlgili Kavramların Anlaşılmasında Kavramsal Değişim Yaklaşımının Etkinliğinin İncelenmesi. Erzurum, Atatürk Üniversitesi, Kimya Eğitimi Anabilim Dalı, Yayınlanmamış Doktora Tezi.

Cho, A., 2002. A fresh take on disorder, or disorderly science? Science, 297,1268-1269.

Ebbing, D.D. General Chemistry, 5th ed.; Houghton Mifflin: Boston, 1996

http:www.cchem.berkeley.edu/chem1b/spring04/handouts/L26_BandTheory.pdf, (05.09.2004)

http:www.entropysite.com/microstate/index.html, (12.12.2004)

Kozliak, E. I. 2004 "Introduction of Entropy via the Boltzmann Distribution in Undergraduate Physical Chemistry: A Molecular Approach", Journal of Chemical Education. 81(11), 1595-1598.

Külahoğlu. T. 2004. Termodinamik. Entropi ve İletişim Teorisi, http://www.mmo.org.tr /muhendismakina/arsiv/2001/ocak/termo.htm (22.10.2004

Lambert, F, L, 2002a.Entropy is simple, qualitatively Journal of Chemical Education. 79(10) 1241-1246.

Lambert, F, L, 2002b,"Disorder-A Cracked Crutch for Supporting Entropy Discussions" Journal of Chemical Education, 79 (2), 187-192.

Lechner, J. H., 1999. Visualizing Entropy, Journal of Chemical Education, 76 (10), 1382-1385

Levine, I., N., 1988, Physical Chemistry, Third Edition, McGraw- Hill, Book Co. Singapore.

Maes, C. and Redig, F., 2000, Positivity of Entropy Production, Journal of Statistical Physics, 101(1-2), 3-15.

Masterton, W. L. and Hurley, C. N. Chemistry: Principles and Reactions, 3rd ed.; Saunders: Philadelphia, 1997

McMurry, J. and Fay, R. C. Chemistry; Prentice-Hall: Englewood Cliffs, NJ, 1995

Michael Guillen, Çeviri: Gürsel Tanrıöver Dünyayı Değiştiren Beş Denklem TÜBİTAK Popüler Bilim Kitapları 141

Moore, J. W., Stanitski, C. L., Wood, J. L., Kotz, J. C. And Joesten, M. D. The Chemical World: Concepts and Applications, 2nd ed.; Saunders: Philadelphia, 1998

Oxtoby, D. W., Freeman, W. A. Block, T. F. Chemistry. Science of Change, 3rd ed.; Saunders: Philadelphia, 1998

Pınarbaşı, T., 2002. Çözünürlük ile İlgili Kavramların Anlaşılmasında Kavramsal Değişim Yaklaşımının Etkinliğinin İncelenmesi. Erzurum, Atatürk Üniversitesi, Kimya Eğitimi Anabilim Dalı, Yayınlanmamış Doktora Tezi.

Selepe, C. and Bradley, J. (1997). Student-Teacher's Conceptual Difficulties in Chemical Thermodynamics. In M. Sanders, (Ed), SAARMSE Fifth Annual Meeting (pp. 316-321). University of the Witwatersrand, Johannesburg, South Africa, 1997.

Sözbilir, M., 2001, A Study of Undergraduates' Understandings of Key Chemical Ideas in Thermodynamics (D. Phil. thesis), Department of Educational Studies, University of York, UK.

Thomas P. L. and Schwenz, R. W. 1998, "College physical chemistry students' conceptions of equilibrium and fundamental thermodynamics," J. Res. Sci. Teach. 35, 1151-1160.

Tomanek, D. (1994). Cases of Content: Studying Content as a Part of a Curriculum Process. Science Education, 78(1), 73-82.

Umland, J. B. and Bellama, J. M. General Chemistry, 2nd ed.; West: Saint Paul, MN, 1996

Zumdahl, S.S. Chemical Principles, Heath: Lexington, MA, 1992.